

# Generación de grilla

- a** Posición y grupo por cada punto
- b** Peso de cada punto
- c** Funciones significativas para cada grupo

**d** Aproximación inicial

**e** Precomputo de ERI y QM/MM

Repetir hasta convergencia SCF

## Construcción matriz Kohn-Sham

- f** ERI
- g** Fuerzas Un electrón
- h** Fuerzas QM/MM

### Fuerzas Intercambio Correlación

- i** Valores de las funciones
- j** Densidad y derivadas
- k** Elementos matriz Kohn-Sham

**l** Diagonalización matriz de Fock

Salida: Función de onda y energía